

# Modelagem Computacional do Transporte Não-Clássico de Partículas Neutras,

Processo CAPES PRINT N° 8887.377771/2018-00.

R. C. Barros, H. Alves Filho, L. R. C. Moraes, L. S. Enomoto e A. Souza da Silva,  
Universidade do Estado do Rio de Janeiro - Instituto Politécnico.

R. Vasques, J. K. Patel e S. A. Agbo,  
The Ohio State University.



# Visão geral

## 1. Introdução

## 2. Metodologia matemática

## 3. Produção científica

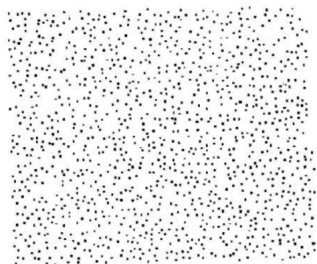
## 4. Pontos para pesquisas futuras

# Introdução

---



- Os fenômenos de transporte de partículas neutras podem apresentar comportamento variado dependendo do arranjo espacial do meio.



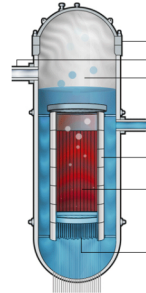
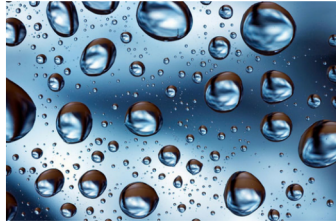
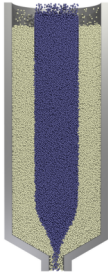
- Centros de espalhamento sem correlação espacial;
- **Atenuação exponencial.**



- Centros de espalhamento correlacionados espacialmente;
- **Atenuação não-exponencial.**

# Introdução

- Códigos computacionais tradicionais implementam o modelo de transporte clássico, que assume uma atenuação exponencial para o fluxo de partículas. Essa situação levou à **expansão dos modelos de transporte clássico para problemas de transporte com atenuação não-exponencial**.
- O meio material ilustrado no lado direito do slide anterior assemelha-se (aproxima) a constituição de vários problemas práticos. Exemplos: Núcleo de Reatores Nucleares do tipo Leito de Esferas (Pebble Bed Nuclear Reactors, PBRs); Constituição de nuvens atmosféricas; Núcleo de Reatores Nucleares de Água Fervente (Boiling Water Reactors).



# Metodologia matemática

---



## Caracterização do comportamento não-exponencial

- Suponha um meio homogêneo. No modelo não-clássico, a probabilidade incremental  $dp$  de que uma partícula irá colidir enquanto percorre uma distância incremental  $ds$  é dada pela relação  $dp = \Sigma_t(s)ds$ , onde  $s$  é a distância percorrida pela partícula desde sua última interação (nascimento ou espalhamento).
- Sejam  $N(s)$  e  $N(s + ds)$  o número de partículas que percorreram uma distância  $s$  e  $s + ds$  sem sofrer uma colisão, respectivamente. Então, temos:

$$N(s + ds) = N(s) + \frac{d}{ds}N(s)ds,$$

↓

$$-\frac{N(s) - N(s + ds)}{N(s)} = \frac{1}{N(s)} \frac{d}{ds}N(s)ds,$$

↓

$$-\Sigma_t(s)ds = \frac{1}{N(s)} \frac{d}{ds}N(s)ds,$$

↓

$$\frac{d}{ds}N(s) + \Sigma_t(s)N(s) = 0,$$

↓

$$N(s) = N(0)e^{-\int_0^s \Sigma_t(s')ds'}.$$

# Comportamento estatístico do meio

- A expansão do espaço de fase da seção de choque macroscópica, **com a inclusão da variável  $s$** , permite a modelagem de problemas de transporte com uma atenuação não-exponencial. Nesse contexto, o ponto chave para modelar com precisão problemas não-clássicos é a geração de seções de choque não-clássicas significativas (precisas).
- Aplicações:
  - Transporte radiativo em nuvens atmosféricas.



$$p(s) = \frac{\overline{\Sigma}_t}{(1 + \overline{\Sigma}_t s/a)^{a+1}}, a = \frac{1}{\overline{\Sigma}_t^2 / \overline{\Sigma}_t^2 - 1}.$$

→ "A Generalized Linear Transport Model for Spatially Correlated Stochastic Media". A. B. Davis and F. Xu.

- Aproximações baseadas na difusão para a equação de Boltzmann.

- Equação da difusão:  $p(s) = \lambda^2 \Sigma_t^2 s e^{-\lambda \Sigma_t s}$ ,  $\lambda = \sqrt{3}$ ;
- Equações P<sub>2</sub> simplificadas:  $p(s) = \frac{5}{9} \lambda^2 \Sigma_t^2 s e^{-\lambda \Sigma_t s}$ ,  $\lambda = \sqrt{\frac{5}{3}}$ ;

→ "The Nonclassical Boltzmann Equation and Diffusion-Based Approximations to the Boltzmann Equation". M. Frank, K. Krycki, E. W. Larsen, and R. Vasques.

- Meios randômicos periódicos.

$$p(\mu, s) = \begin{cases} \frac{\Sigma_t \ell_1}{\ell_1} (n\ell + \ell_1 - s|\mu|) e^{-\Sigma_t \ell_1 (s - n\ell_2 / |\mu|)}, & \text{if } n\ell \leq s|\mu| \leq n\ell + \ell_1, \\ \frac{\Sigma_t \ell_1}{\ell_1} (s|\mu| - n\ell - \ell_2) e^{-\Sigma_t \ell_1 [s - (n+1)\ell_2 / |\mu|]}, & \text{if } n\ell + \ell_2 \leq s|\mu| \leq (n+1)\ell, \\ & n = 0, 1, \dots \end{cases}$$

→ "Nonclassical Particle Transport in One-Dimensional Random Periodic Media". R. Vasques, K. Krycki and R. N. Slaybaugh.

- Transporte de nêutrons em PBRs (unidimensional).

- A seção de choque macroscópica pode ser calculada através da relação

$$\Sigma_t(s) = \frac{p(s)}{1 - \int_0^s p(s') ds'},$$

onde  $p(s)$  é a função distribuição de livre caminho (free-path distribution function).



## Equação de transporte não-clássico

- Seguindo a expansão do espaço de fase, a **Equação Linear Generalizada de Boltzmann (Generalized Linear Boltzmann Equation, GLBE)** para problemas não-clássicos de transporte foi derivada.

$$\frac{\partial}{\partial s} \Psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, s) + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, s) + \Sigma_t(\boldsymbol{\Omega}, s) \Psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, s) = \delta(s) \left[ c \int_{4\pi} \int_0^\infty P(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \Sigma_t(\boldsymbol{\Omega}', s') \Psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}', s') ds' d\boldsymbol{\Omega}' + \frac{Q(\mathbf{x})}{4\pi} \right], \quad \mathbf{x} \in V, \boldsymbol{\Omega} \in 4\pi, 0 < s.$$

- A notação é:

$\mathbf{x} \rightarrow$  é um ponto do espaço,  $\boldsymbol{\Omega} \rightarrow$  a direção de migração das partículas e  $s \rightarrow$  distância percorrida pela partícula desde a sua prévia interação;

$\Psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, s) \rightarrow$  Fluxo angular não-clássico;

$P(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega}' \rightarrow$  Probabilidade de que, quando uma partícula viajando em  $d\boldsymbol{\Omega}'$  em termo de  $\boldsymbol{\Omega}'$  sofre espalhamento, sua direção de migração resultante estará em  $d\boldsymbol{\Omega}$  em termo de  $\boldsymbol{\Omega}$ ;

$c \rightarrow$  Razão de espalhamento;

$\delta(s) \rightarrow$  Função delta de Dirac. **Segue a definição da variável  $s$ ;**

$Q(\mathbf{x})$  Componente espacial de uma fonte de partículas;

$\Psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}) = \int_0^\infty \Psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, s) ds \rightarrow$  **Fluxo angular clássico.**

# Abordagem Espectral - Spectral Approach

- A equação de transporte não-clássico, i. e., a GLBE, é mais complexa do que a forma clássica devido à expansão do espaço de fase para incluir a dependência em  $s$ .
- A Abordagem Espectral (Spectral Approach, SA) foi desenvolvida para lidar de maneira eficiente com a dependência de  $s$ . No SA, o fluxo angular não-clássico é expandido como

$$\Psi(\mathbf{x}, \Omega, s) \approx \sum_{m=0}^M \psi_m(\mathbf{x}, \Omega) L_m(s) e^{-\int_0^s \Sigma_t(\Omega, s') ds'},$$

onde

$M \rightarrow$  Ordem da expansão de Laguerre;

$L_m(s) \rightarrow$  Polinômio de Laguerre de grau  $m$ .

## Abordagem Espectral - Spectral Approach

- Ao substituir essa expansão do fluxo angular não-clássico na GLBE e realizar uma série de manipulações algébricas, obtemos a expressão:

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi_m(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}) + \sum_{j=0}^m \psi_j(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}) = c \int_{4\pi} P(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \sum_{k=0}^M \psi_k(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}') \mathcal{L}_k(\boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' + \frac{Q(\mathbf{x})}{4\pi}, m = 0, 1, \dots, M,$$

onde

$$\mathcal{L}_k(\boldsymbol{\Omega}') = \int_0^\infty p(\boldsymbol{\Omega}', s') L_k(s') ds', \text{ tal que, } p(\boldsymbol{\Omega}', s') = \Sigma_t(\boldsymbol{\Omega}', s') e^{-\int_0^{s'} \Sigma_t(\boldsymbol{\Omega}', s'') ds''}.$$

- Uma vez que as funções  $\mathcal{L}_k(\boldsymbol{\Omega}')$  são calculadas, os problemas de transporte não-clássicos podem ser resolvidos numericamente usando métodos determinísticos convencionais.

# Produção científica

---



- **Artigos completos publicados em periódicos:**

1. Vasques, R., Moraes, L. R. C., Barros, R. C., & Slaybaugh, R. N. (2020). A spectral approach for solving the nonclassical transport equation. *Journal of Computational Physics*, 402, 109078. doi: 10.1016/j.jcp.2019.109078.
2. Moraes, L. R. C., Barichello, L. B., Barros, R. C., & Vasques, R. (2022). On the application of the analytical discrete ordinates method to the solution of nonclassical transport problems in slab geometry. *Journal of Computational Physics*, 455, 110982. doi: 10.1016/j.jcp.2022.110982.
3. Moraes, L. R. C., Patel, J. K., Barros, R. C., & Vasques, R. (2022). An improved spectral approach for solving the nonclassical neutral particle transport equation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 290, 108282. doi: 10.1016/j.jqsrt.2022.108282.
4. Patel, J. K., Moraes, L. R. C., Vasques, R., & Barros, R. C. (2022). Transport synthetic acceleration for the solution of the one-speed nonclassical spectral SN equations in slab geometry. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 401, 113768. doi: 10.1016/j.cam.2021.113768.
5. Moraes, L. R. C., Vasques, R., & Barros, R. C. (2023). On the occurrence of linearly dependent eigenvectors in nonclassical transport calculations. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 295, 108407. doi: 10.1016/j.jqsrt.2022.108407.
6. Agbo, S. A., Moraes, L. R. C., & Vasques, R. (2024). On the use of spherical harmonic approximations in nonclassical particle transport problems. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 324, 109048. doi: 10.1016/j.jqsrt.2024.109048.

- **Trabalhos completos publicados em anais de congressos:**

1. S. A. Agbo ; Moraes, L. R. C. ; R. Vasques . Derivation of Spherical Harmonic Equations for Nonclassical Particle Transport. In: International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering, 2023, Ontario. Proceedings of the International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering, 2023.
2. Alan S. S. ; Moraes, L. R. C. ; R. C. Barros ; R. Vasques . P1 Synthetic Acceleration and Convergence Analysis for the Solution of the One-Speed Non-Classical Spectral SN Equations in Slab Geometry. In: International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering, 2023, Ontario. Proceedings of the International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering, 2023.
3. Enomoto, L. S.; Alves Filho, Hermes ; Vasques, R. Derivation of a Multigroup Diffusion Equation for Nonclassical Problems. In: International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering, 2023, Ontario. Proceedings of the International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering, 2023.
4. Moraes, L. R. C.; R. C. Barros ; Vasques, R. A review of the deterministic solution of nonclassical transport problems. In: International Nuclear Atlantic Conference, 2021. Proceedings of the International Nuclear Atlantic Conference, 2021.

# Produção científica

5. Silva, A. S.; Enomoto, L. S.; Barros, R. C. PN Synthetic Acceleration for the Source Iteration Scheme in Slab Geometry Discrete Ordinates Transport Calculations. In: 2021 International Nuclear Atlantic Conference.
6. P. Japan; Moraes, L. R. C.; R. Vasques; R. C. Barros. P1 Synthetic Acceleration for Nonclassical Spectral SN Equations in Slab Geometry. In: The 26th International Conference on Transport Theory, 2019, Paris, França. The 26th International Conference on Transport Theory, 2019.

## • Orientações e supervisões (5 ao total):

- Pós-doutoramento Japan K. Patel - The Ohio State University (Completo);
- Pós-doutoramento Leonardo R. C. Moraes - The Ohio State University (Completo\*);
- Doutorado Sunday A. Agbo - The Ohio State University (Em andamento);
- Doutorado Alan S. Silva - Instituto Politécnico com período Sanduíche (6 meses) na The Ohio State University (Em andamento);
- Doutorado Lisa S. Enomoto - Instituto Politécnico com período Sanduíche (6 meses) na The Ohio State University (Em andamento);

## • Missões técnicas:

- Missão 1 - Dezembro 2019 (10 dias); Missão 2 - Abril 2022 (8 dias); Missão 3 - Agosto 2023 (10 dias); Missão de fechamento do projeto - Outubro 2024 (12 dias).

## • Apresentações de Trabalho:

- 16th e 15th International Conferences on Integral Methods in Science and Engineering;
- 2024 International Nuclear Atlantic Conferences;
- 2023, 2021 e 2019 International Conferences on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering;



## Pontos para pesquisas futuras

---



## Pontos para pesquisas futuras

- A metodologia apresentada para lidar com problemas de transporte não-clássicos tem demonstrado um potencial promissor, indicando possíveis direções para futuras pesquisas, tais como:
  - Incorporar considerações para sistemas finitos;
  - Desenvolver funções  $p(\Omega, s)$  e  $\Sigma_t(\Omega, s)$  precisas para problemas de transporte não-clássicos;
  - Melhorar a robustez dos métodos selecionados para lidar com as dependências de  $x$  e  $s$  na GLBE;
  - Estender a metodologia para diferentes geometrias e dimensões.



# Agradecimentos



**THE OHIO STATE UNIVERSITY**  
COLLEGE OF ENGINEERING



**NON CLASSICAL**  
TRANSPORT



**Muito obrigado pela atenção!**

